

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 10 月 26 日現在

機関番号：24506

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2015

課題番号：26790080

研究課題名(和文) 高分子液体の熱流体潤滑に対するマルチスケールシミュレーション技術の開発

研究課題名(英文) Development of a multiscale simulation for thermal lubrication of polymeric liquids

研究代表者

安田 修悟 (Yasuda, Shugo)

兵庫県立大学・シミュレーション学研究科・准教授

研究者番号：70456797

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,900,000円

研究成果の概要(和文)：高分子液体の熱潤滑に対する新しいマルチスケールシミュレーション、Synchronized Molecular-Dynamics (SMD) 法を開発した。SMD法では、巨視的な熱・運動量の輸送方程式を満足するように同期された複数の分子動力学(MD)セルが、複雑流体の局所的な流体要素における発熱、応力、内部構造を計算する。MD法では扱うことが困難な巨視的なスケールでの複雑流体の挙動を任意の分子モデルに基づき計算することができる点が大きな特徴である。この方法を用いて、巨視的なスケールでの高分子液体の熱潤滑を解析し、流動と発熱の競合によって高分子の構造変化に新しい転移現象が起こることを明らかにした。

研究成果の概要(英文)：The synchronized molecular dynamics simulation via macroscopic heat and momentum transfer is developed for the thermal lubrication problems. This method is applied to the lubrication of a polymeric liquid between fast moving parallel plates. The rheological properties and conformation of polymer chains coupled with the local viscous heating are investigated with a non-dimensional parameter, i.e., the Nahme-Griffith number, which is defined by the ratio of the viscous heating to the thermal conduction at the characteristic temperature required to sufficiently change the viscosity. The results also clarify a new transitional phenomenon in the conformational dynamics of polymer chains due to the competition of the flow and thermal agitation.

研究分野：計算科学、流体力学

キーワード：マルチスケール 高分子液体 熱潤滑

1. 研究開始当初の背景

コロイド、高分子、液晶などの複雑液体は食品、化粧品、プラスチック、ゴムなど我々の身のまわりの製品や最先端の機能性材料、生体材料など様々な工業製品に広く利用されている。複雑液体の挙動を計算機シミュレーションによって正確に予測することは工学的に重要な課題であり、この課題に取り組む研究は国内・国外で盛んに行われている。

複雑液体では液体を構成する分子の内部自由度の運動と液体の巨視的な流動やエネルギー輸送が互いに強く影響しあうことで複雑な移動現象を示す。このため連続体近似に基づく計算流体力学 (CFD) ではその振舞いを正確に予測することはできない。一方、物質を構成する分子をモデル化し、すべての分子の運動を追跡する分子動力学法 (MD) では原理的には複雑な物質に対しても適応可能である。しかし、実際の工学分野で重要となるマクロスケールのシステムをまるごと MD 法によってシミュレーションするには数兆個以上の粒子を相互作用させながら各粒子の運動を追跡する必要があり、世界最速の計算機を利用したとしても現実的には困難である。この問題を解決するための一つの方法として、MD と CFD のような異なるスケールでの物理現象を対象とするシミュレーション法を互いに接続するマルチスケールシミュレーション法の開発が、研究開始当初から現在に至るまで国際的に活発に行われている。

研究開始当初には、我々の先駆的な基礎研究の成果も含め、この分野の幾つかの重要な基礎研究の報告があがっていた。しかしながら、マイクロスケールを超えるマクロなシステムにおいて重要となる、工学的に重要となる現象対象とした計算結果の報告は、研究当初には殆ど報告されていない。

2. 研究の目的

本研究では、我々が研究開発当初にすでに成果を上げていた基礎研究の結果をさらに発展させて、実際の工学分野において重要となる現象に対して、マルチスケールシミュレーションの有効性を実証することを目的とする。具体的には、種々の機械システムにおいて必要不可欠な要素技術である潤滑の問題を対象とし、これまでのマルチスケールシミュレーション法を拡張し、具体的に熱潤滑の問題を解析する。MD 法では全く太刀打ちできないマイクロメートルを超えるマクロスケールで発現する流動と発熱の現象を新しいマルチスケール法で詳細に解析することによって、これまでの流体シミュレーションや分子シミュレーションでは調べることの出来ない、マクロスケールでの熱流動現象に対して分子レベルでのダイナミクスを明らかにする。具体的な応用問題の解析を通して、マルチスケール法の有効性を実証することを研究目的とする。

3. 研究の方法

マクロスケールでの熱潤滑の問題を解析するために、研究開発当初までに我々独自で開発したマルチスケールシミュレーション法を拡張する。具体的には、これまで等温の流動にしか適応できなかった方法を、流動による粘性発熱を再現できるように拡張する。

内部構造を有する複雑流体に対しては、流動と発熱を正確に記述することのできるモデル構成方程式を造ることは難しい。一方、分子シミュレーションでは、この複雑な現象を多数の分子の運動の結果として、自発的に再現することが可能である。この利点を活かして、我々の方法では、流体要素の流動、発熱、内部構造の変化のダイナミクスをMD法で計算する。これによって、本来、マクロなレベルでの記述が難しい現象を分子レベルで正確に計算することを可能とする。一方で、複数の流体要素を同時に計算する際には、各流体要素間での運動量や熱の輸送を考慮しなければならない。特に、実際の機械システムでは、材料流体や機能流体の挙動は、システム全体でのマクロな輸送現象と切り離して考えることができない。そこで、本研究では、多数のMDセルを用いてシステムの中の局所的な流体要素における分子ダイナミクスをMD法によって正確に計算すると同時に、異なるMDセル間において、マクロな熱と運動量の輸送方程式を満たすことができる方法を開発する。

手法の開発と並行して、具体的な応用の準備も進める。ここでは、工学的に一般的な潤滑油を想定し、短い鎖で構成された油の分子モデルを用いる。(分子量は大きくは無いが、以下では、単純液体と区別するために、この分子モデルで構成される液体を高分子液体と呼ぶ。) また、本解析において焦点とする熱と流動と高分子構造のダイナミクスによる現象を明確に再現するために、あえて分子の化学的詳細を省いたシンプルな高分子モデルを採用する。

4. 研究成果

本研究では、Synchronized Molecular-Dynamics (SMD)法を新たに開発した。SMD 法

Synchronized Molecular Dynamics

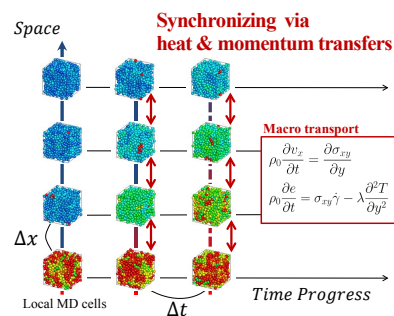


図 1 Synchronized Molecular-Dynamics 法の概略図

では、多数のMDセルを用いて流体システムにおける複数の局所的な流体要素における分子のダイナミクスを計算する。同時に、各MDセルは、システム全体での熱と運動量の局所的な輸送が満たされるように時々、同期させる。これによって、本来扱いの困難な、流動と発熱と内部構造の変化の相互作用を任意の分子モデルを用いて、巨視的なスケールに及ぶ現象を解析することができるようになる。図1にその概略を示す。この画期的な方法は、高いインパクトファクターを示す雑誌にも掲載され、その成果が高く評価されている。〔雑誌論文④〕

SMD法を用いて、高分子液体の熱潤滑の問題の解析を行った。マイクロスケールを超える巨視的なシステムで重要となる粘性発熱について詳細に調べ、これまで明らかにされていなかった流動と発熱の競合関係によって生じる新しいタイプの内部構造変化の転移的な現象があることが分かった。具体的には、図2に示すように、発熱が顕著となる高速流動に至るまでの比較的低速な流動領域では、高分子鎖の内部構造は流動によって支配的に決定されるが、さらに流動を強めて、発熱が顕著となる高速流動領域では、高分子の内部構造はもはや流動には殆ど支配されず、逆に発熱による温度上昇によって高分子の熱運動が活性化され、流動による配向した構造から一様なランダムな構造が回復されることが明らかにされた。流動を強めることで、逆に流動によって束縛されている内部構造の配向が崩れるという結果は、一般的な予想を裏切る面白い現象であり、巨視的な現象を分子レベルで精確に解析することによって初めて明らかにされる現象である。これまでに知られていなかった物理現象をマルチスケール法によって初めて明らかにすることが出来たという点で、世界にも先駆的な研究として高く評価されている。

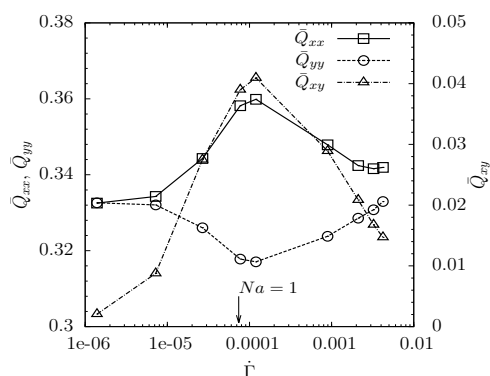


図2 流動の強さ $\dot{\gamma}$ と高分子構造 $Q_{\alpha\beta}$ の関係

本研究では、工学分野において実際に重要となるマイクロスケールでの現象にSMD法を適用することで、その有効性を実証することができた。解析した熱潤滑の問題は、機械システムにおいて最も重要な要素技術の一つであり、本研究の成果はマルチスケール法の実際の工学分野への展開に貢献するものである。

また、マルチスケール法が工学分野への応用のみならず、新たな物理現象の発見と解明にも重要となる可能性があることを示唆するものであり、社会的にも学術的にも波及効果を期待することができる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 4件)

- ① S. Yasuda and R. Yamamoto, "Synchronized molecular-dynamics simulation for the thermal lubrication of a polymeric liquid between parallel plates", *Computers & Fluids* 124, pp. 185-189 (2016). (査読有)
DOI:10.1016/j.compfluid.2015.05.018
- ② S. Yasuda and R. Yamamoto, "Multiscale simulation for thermo-hydrodynamic lubrication of a polymeric liquid between parallel plate", *Molecular Simulation* 41, pp. 1002-1005 (2015). (査読有)
DOI: 10.1080/08927022.2014.951639
- ③ 安田修悟, 山本量一, "Synchronized Molecular Dynamic 法による高分子潤滑の解析", *アンサンブル* 17, pp. 30-34 (2015). (依頼原稿, 査読無)
DOI: 10.11436/mssj.17.30
- ④ S. Yasuda and R. Yamamoto, "Synchronized molecular dynamics simulation via macroscopic heat and momentum transfer: an application to polymer lubrication", *Physical Review X* 4, 041011 (2014). (査読有)
DOI:10.1103/PhysRevX.4.041011

〔学会発表〕(計 16件)

- ① S. YASUDA and R. YAMAMOTO, "Synchronized Molecular-Dynamics simulation via global heat and momentum transports", SIAM Conference on mathematical aspects of materials science, 8-12th May 2016 (Philadelphia, USA). [Invited]
- ② S. YASUDA and R. YAMAMOTO, "Synchronized Molecular-Dynamics simulation for thermal lubrication of a polymeric liquid between parallel plates", 68th APS DFD Meeting, 21-26th November 2015 (Boston, USA).
- ③ 加島悠, 安田修悟, "LAMMPSを用いたマイクロ流路内の単純流体の流れ", 第29回分子シミュレーション討論会, 2015年11月30日-12月1日(朱鷺メッセ, 新潟県新潟市).
- ④ 常田真平, 安田修悟, "せん断流れ下での

- 高分子液体の熱伝導”, 第 29 回分子シミュレーション討論会, 2015 年 11 月 30 日-12 月 1 日 (朱鷺メッセ, 新潟県新潟市).
- ⑤ S. YASUDA, “Monte Carlo simulation for kinetic chemotaxis model of bacteria”, Workshop on “Aspects of motions in biofluid problems”, 26-28th October 2015 (京都大学 RIMS, 京都府京都市).
- ⑥ S. YASUDA, “A Monte Carlo simulation on the basis of the kinetic theory for chemo-tactic bacteria”, Seminar series on Fluid Dynamics for Non-equilibrium phenomena, 13th January 2015 (京都大学桂キャンパス, 京都府京都市). [Invited]
- ⑦ S. YASUDA “A Monte Carlo simulation for the collective motion of bacteria on the basis of the kinetic theory”, Mathematical Analysis on Fluid Dynamics and Conservation Laws, 23rd January 2015 (東京工業大学, 東京都目黒区). [Invited]
- ⑧ S. YASUDA “A Monte Carlo simulation on the basis of the kinetic theory for chemo-tactic bacteria”, International Conference on Mathematical Modeling and Applications 2014: Crowd Dynamics, 9-12th January 2015 (明治大学中野キャンパス, 東京都中野区).
- ⑨ 安田修悟, “運動論に基づく微生物集団のモンテカルロシミュレーション”, 第 28 回数値流体力学シンポジウム, 2014 年 12 月 9-10 日 (タワーホール船堀, 東京都江戸川区).
- ⑩ S. YASUDA and R. YAMAMOTO, “Synchronized molecular dynamics simulation via macroscopic heat and momentum transfer for polymer lubrications”, International Symposium on Extended Molecular Dynamics and Enhanced Sampling: Nose Dynamics 30 Years, 9-11th November 2014 (慶応大学三田キャンパス, 東京都港区).
- ⑪ 安田修悟, “発泡材料の力学特性シミュレーション”, 第 1 回計算科学連携センター学術会議, 2014 年 11 月 4 日 (兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス, 兵庫県神戸市). (招待講演)
- ⑫ S. YASUDA and Ryoichi YAMAMOTO, “Synchronized molecular dynamics simulation via macroscopic heat and momentum transfer for non-isothermal polymeric flows”, 7th International Conference on Multiscale Material Modeling, 6-10th October 2014 (Berkeley, California, USA).
- ⑬ 安田修悟, “高分子潤滑のマルチスケールモデリング”, 計算力学イブニングセミナー, 2014 年 9 月 18 日 (中央大学後楽園キャンパス, 東京都文京区). (招待講演)
- ⑭ 安田修悟, “複雑流体のマルチスケールモデリング ~スパコンを使った新しい材料シミュレーション~”, 兵庫県立大学知の交流シンポジウム, 2014 年 9 月 (姫路商工会議所, 兵庫県姫路市).
- ⑮ 安田修悟, “複雑流体のマルチスケールモデリング”, 第 3 回兵庫県立大学「異分野融合若手研究者 Science & Technology クラブ, 2014 年 9 月 (じばさんビル, 兵庫県姫路市). (招待講演)
- ⑯ S. YASUDA and Ryoichi YAMAMOTO, “Synchronized molecular dynamics simulation via macroscopic heat and momentum transfer for polymeric liquids”, The Eleventh International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science, 13-21th July 2014 (New York City, New York, USA).

[その他]

- ① 姫路ケーブルテレビ WINK 出演
キラリ! 姫路・播磨のものづくり How to テクノ vol. 19,
- ② 第 1 回計算科学連携センターセミナー (主催: 兵庫県立大学) の企画・運営. (参加者 60 名, 神戸新聞朝刊 (11 月 13 日) 第 3 面に活動状況が掲載)
- ③ 第 1 回計算科学連携センター学術会議 (主催: 兵庫県立大学) の企画・運営. (参加者 80 名)

ホームページ等

ResearcherID:C-3670-2009

<http://www.researcherid.com/rid/C-3670-2009>

ORCID:0000-0002-1824-0032

<http://orcid.org/0000-0002-1824-0032>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

安田 修悟 (YASUDA, Shugo)

兵庫県立大学・シミュレーション学研究所・准教授

研究者番号: 70456797